

Title	原子力材料挙動のモデリング研究
Author(s)	森下, 和功
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究 成果報告書 (2015), 2015: 65-66
Issue Date	2015
URL	http://hdl.handle.net/2433/197627
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

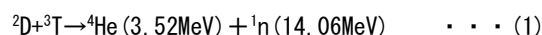
原子力材料挙動のモデリング研究

Modeling of Nuclear Reactor Materials Behavior under Irradiation

京都大学エネルギー理工学研究所 森下和功

【背景と目的】

環境・エネルギー問題を恒久的に解決する将来的なテクノロジーのひとつに核融合炉発電があり、現在フランスのガダラッシュで国際熱核融合実験炉（ITER）が建設中である。核融合反応は、以下の式で示される。



ただし、D は重水素、T は三重水素である。反応後はヘリウムと中性子(n)に分裂し、高エネルギーの中性子からエネルギーを取り出すことを想定している。その際、核融合炉壁は、核融合反応によって作り出された中性子や、炉心プラズマ領域において中性化して飛び出してしてくる水素同位体・ヘリウムなどの照射を受ける。特に、ヘリウムの照射効果は著しく、超高密度のヘリウムバブルなどの独特な格子欠陥を形成することが知られている。

ヘリウムバブルとは、希ガスであるヘリウム原子が固体内に空洞を作り、三次元状に集合したものである。これが材料表面に形成されると、表面層の剥離や重水素・三重水素の放出特性に変化を与え、結果としてプラズマの閉じ込めの安定性を阻害する可能性がある。

最近の研究により、エネルギーの低いプラズマによる照射においても高密度のヘリウムバブルが形成されることが明らかになり（従来の理論では形成されるはずがないと考えられてきた）、その挙動の解明が必須とされている。透過型電子顕微鏡などの実験手法だけでは原子レベルでの挙動についての知見を得ることはできないので、本研究ではコンピュータシミュレーションを用いて核融合炉材料中におけるヘリウムの基礎的な挙動を解明することを目的とする。

【研究手法】

本研究では純鉄にヘリウムを照射する系についての分子動力学計算を行った。He-He 間および He-Fe 間のポテンシャルについては、京都大学化学研究所のスーパーコンピュータシステムで提供されている Materials Studio 6.1 に同梱されている DMol3 を利用して作成した。DMol3 は密度汎関数理論に基づく第一原理計算ソフトであり、内殻電子まで含んだ計算が可能であることから、原子間ポテンシャル作成に最適であると考えられる。なお、Fe-Fe 間は、金属中における自由電子が及ぼす多体効果を含んだ Finnis-Sinclair ポテンシャルを利用した。実験系としては、原子数 432 個の Fe のスーパーセルを作成し、その中にいくつかのヘリウムを配置し、NTP アンサンブル法(粒子数、温度、圧力が一定)を使用してヘリウムの挙動を調べた。

【結果および考察】

図 1 はスーパーセルの内部にヘリウムを 36 個をランダムに配置した初期構造である。図 1(a)～(d) は初期構造から 300 K で一定温度に保ち、40 ps まで計算したときの構造を示す。分子動力学計算を開始すると、図 1(b)に示すように鉄中のヘリウムは格子間を拡散していくことにより徐々に集合していき、“格子間ヘリウム集合体”を形成する。時間の経過に伴い格子間ヘリウム集合体は成長していく（ヘリウムを吸収していく）が、ある時点で図 1(c)に示すように複数の鉄原子をまとめて格子間に放出することで大きな空孔集合体を形成し、そこにヘリウムが捕獲されるようになる。時間の経過に伴い、次々に鉄は押し出され空孔は増加していき、空孔形成が終了

したら、すべてのヘリウムはこの空孔集合体に捕獲され安定化する(図 1(d))。この状態は極めて安定なヘリウムクラスターであり、照射下で物質に様々な影響を与えるヘリウムバブルの安定核である。このことは、ヘリウムが結晶中に高濃度に存在するとき、原子空孔を自発的に作り出すことでバブルの安定核が形成されることを示唆している。本研究により、ヘリウム濃度がかかなり高い状況下 (He/Fe 比が 0.05 程度以上) では、原子空孔がなくともヘリウムバブルを形成し得ることが明らかになった。核融合炉第一壁環境下に入射してくるヘリウムのフラックス成分のほとんどが 100 eV という状況を考慮すると、本研究で示唆されたバブル形成モデルが核融合炉環境下では主体となる可能性がある。

【謝辞】

本研究を実施するにあたり、琉球大学教育学部 岩切宏友 准教授、琉球大学大学院 教育学研究科 修士課程 狩俣佑妃氏、京都大学大学院 エネルギー科学研究科 修士課程 中筋俊樹氏に多くのご協力をいただきました。ここに感謝の意を示します。

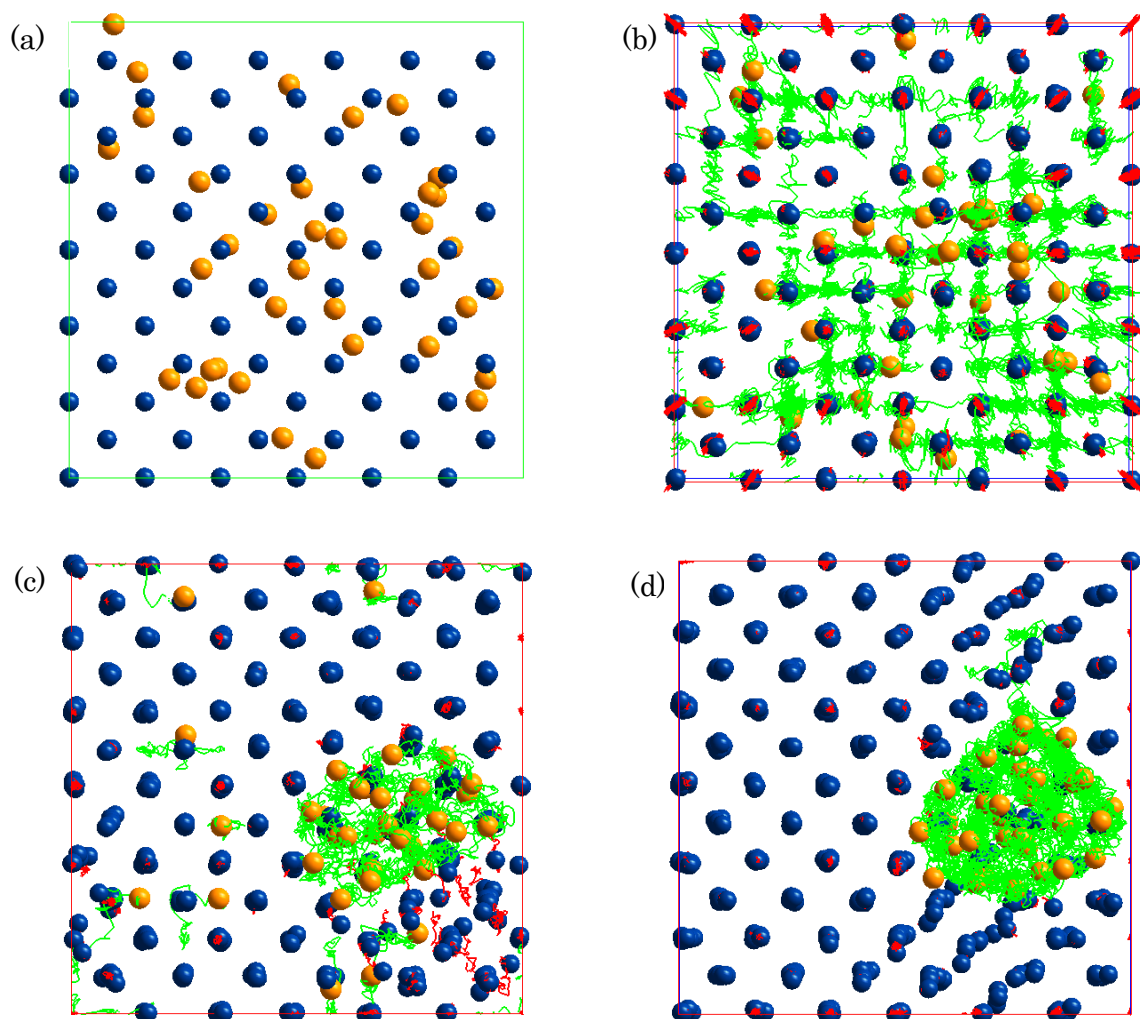


図1 分子動力学計算により計算された鉄中のヘリウムの凝集の様子。青が鉄原子、濃黄がヘリウム原子であり、緑線および赤線がそれぞれの原子の軌跡を示す。(a) 0 ps (初期配置)、(b) 5 ps 後、(c) 5 ps 後、(d) 40 ps 後。